



Programowanie współbieżne

Laboratorium-2. 2010/2011
A. Baran

Java – wywoływanie metod

- Wywołanie metody z metody statycznej

```
public class Timestamp {  
    void jakasMethoda() { // ...  
    public static void main(String[] args) {  
  
        jakasMethoda(); // Nie! Nie pracuje.  
  
        Timestamp ts = new Timestamp();  
        ts.someMethod(); // Pracuje!  
        ...  
    }  
}
```



Dynamika molekularna

- Zasady ogólne. N cząstek. Siła F. Położenie względne \vec{r}_{ij}

$$\vec{F}_{ij} = \sum_{j=1, N; j \neq i} F(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \hat{\vec{r}}_{ij}$$

- Równania ruchu cząstek

$$\frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \frac{\vec{F}_i(R)}{m_i}$$

- PBC – periodic boundary conditions



Dynamika molekularna (DM)

- Stała energia
 - Inicjalizacja
 - Start symulacji
 - Symulacja i zapis wyników

INICJALIZACJA

Sieć Bravais fcc. W układzie jest $4M^3$ cząstek (=108, 256, 500, 864,...)

Rozkład Maxwella z zadaną temperaturą (rozkład Gaussa $\exp(-mv_x^2/(2k_B T))$)

Pęd całkowity = 0 → Po obliczeniu pędu średniego $\langle p \rangle$ odejmujemy go od pędu każdej cząstki

START SYMULACJI

Całkowanie równań ruchu. Algorytm Verleta (czas $t=nh$):

$$\vec{r}(t + h) = 2\vec{r}(t) - r(t - h) + h^2 \vec{F}[\vec{r}(t)]/m$$



DM cd.

- Prędkości

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t+h) - \vec{r}(t-h)}{2h} + O(h^2)$$

- Velocity Verlet Algorithm (VVA)

$$\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + f\vec{v}(t) + h^2\vec{F}(t)/2$$

$$\vec{v}(t+h) = \vec{v}(t) + h[\vec{F}(t+f) + \vec{F}(t)]/2$$

- Obcięcie siły (złamanie zasady zachowania energii). Możliwe rozwiązania.



DM cd.

- Parametrem kontrolnym jest temperatura T . Należy tak wyskalować prędkości wszystkich cząstek by była ona równa temperaturze zadanej

$$\vec{v}_i(t) \rightarrow \lambda \vec{v}_i(t), \quad i = 1, 2, \dots$$

- Parametr λ wybiera się tak by zachodził związek

$$\lambda = \sqrt{\frac{(N-1)3k_B T}{\sum_{i=1}^N m v_i^2}}$$

Czynnik $(N-1)$: niezależne prędkości; pęd zachowany \rightarrow liczba niezależnych prędkości redukuje się o 3.



DM cd.

KONTYNUACJA SYMULACJI

Obliczenia wielkości fizycznych (średnich)

$$\bar{A} = \frac{1}{n - n_0} \sum_{\nu > n_0}^n A_\nu$$

Tutaj n_0 jest liczbą kroków potrzebnych do uzyskania równowagi.

Korelacje...



Rozkład Gaussa

- Rozkład ...

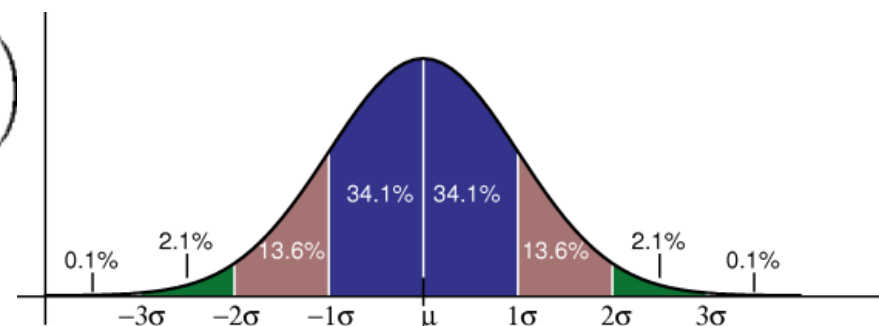
$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

$$\phi(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

- Dystrybuanta

$$\Phi(z) = \int_{-\infty}^z \phi(x) dx$$

$$\Phi(z; \mu, \sigma) = \int_{-\infty}^z \phi(x; \mu, \sigma) dx$$



68% w obrębie 1σ standardowego odchylenia
 95% „ „ 2σ
 99,7% leży w obrębie 3σ

- Jak wygenerować pseudolosowe liczby gaussowskie?

